

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Térbeli statisztikai modellek és alkalmazásaik

Sikolya Kinga

Témavezető: Dr. Baran Sándor



Debreceni Egyetem
Informatikai Tudományok Doktori Iskola
Debrecen, 2014.

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Térbeli statisztikai modellek és alkalmazásaik

Sikolya Kinga

Témavezető: Dr. Baran Sándor



Debreceni Egyetem
Informatikai Tudományok Doktori Iskola
Debrecen, 2014.

Bevezetés

Ezen disszertáció térbeli statisztikai modellek paraméterbecsléseivel, valamint optimális mintavételi elhelyezéseivel kapcsolatban tartalmaz új kutatási eredményeket. Két fejezetből áll, melyek külön is tárgyalhatóak. A könnyebb követhetőség kedvéért a tézisbeli tételek és definíciók számozás megegyezik a disszertációban használt számozással.

A dolgozat első felében egy olyan térbeli lineáris regressziós modellt tekintünk, ahol a meghajtó folyamat egy Wiener- vagy pedig egy stacionárius, illetve nemstacionárius Ornstein-Uhlenbeck (OU) mező, és egy meglehetősen általános megfigyelési tartomány esetén keressük a regressziós paraméterek maximum likelihood (ML) becslését. Ennek a regressziós modellnek speciális eseteiben a paraméterek becslését már többen vizsgálták a szakirodalomban. A legegyszerűbb esettel Rozanov (1968) a 60-es évek végén kezdett el foglalkozni, amikor is egyetlen paramétertől függő trenddel eltolt Wiener mezőt figyelt meg egy téglalapon és karakterisztikus egyenletek segítségével meghatározta az ismeretlen trend paraméter ML becslését. Ezt az esetet általánosította Arató, N. M. (1997a) a megfigyelési tartomány bonyolultabbá tételével. Baran, Pap és Zuilen (2003, 2004, 2011) a korábban használt sztochasztikus parciális differenciálegyenletek helyett az úgynevezett diszkrét approximáció módszerét alkalmazva a korábbiaknál általánosabb feltételek mellett és három különböző, egyre komplexebb megfigyelési tartományt tekintve adta meg az ismeretlen trend paraméter becslését. Kiindulva Baran, Pap és Zuilen (2011) eredményeiből sikerült kiterjeszteni a regressziós modell ismeretlen paramétereinek számát tetszőleges p tagra és megadni ezek ML becslését. Ehhez fő eszközként a például Baran, Pap és Zuilen (2011) által leírt diszkrét approximációt használjuk.

Azzal az esettel, amikor a meghajtó folyamat egy stacionárius OU mező Arató, N. M. (1997b) kezdett el foglalkozni. A Rozanov (1990) által bevezetett sztochasztikus differenciálegyenletek módszerét alkalmazva megadta egy téglalapon megfigyelt egyetlen eltolásparamétert tartalmazó véletlen mező ismeretlen paraméterének ML becslését. Általánosabb feltételek mellett Baran, Pap és Zuilen (2003) diszkrét approximáció segítségével igazolta Arató, N. M. (1997b) eredményét stacionárius, illetve nemstacionárius OU mező esetén. Ezen eredményeket sikerült kiterjeszteni Baran, Pap és Zuilen (2011) által használt legáltalánosabb megfigyelési tartományt és tetszőleges számú ismert függvény lineáris kombinációjaként előálló trendet tekintve.

Az első rész öt szimulációs példával zárul, melyek segítségével szemléltetjük Arató, N. M. (1997a), Baran, Pap és Zuilen (2003, 2004, 2011) elméleti eredményeit, valamint a dolgozat első részének fő tételeit. A fenti eredmények Baran és Sikolya (2012a, b) cikkekben kerültek közlésre.

A disszertáció második felében egy számos helyen alkalmazható problémát, az úgynevezett optimális mintavételi terv meghatározását vizsgáljuk egy konstans trenddel eltolt OU mező esetén. Az itt leírt eredményeket Baran Sándorral és Milan Stehlíkkal közösen

értük el és a Baran, Sikolya és Stehlík (2013, 2014) dolgozatokban közöltük. Az optimalitásnak többféle kritériuma van: paraméterbecslés esetén ilyen például a D-optimalitás, amikor a paraméterekre vonatkozó Fisher-féle információ egy alkalmas függvényét maximalizáljuk, előrejelzések esetén pedig, például, az úgynevezett Integrated Mean Squared Prediction Error (IMSPE) vagy az entrópia kritérium.

Paraméterbecslés szerinti optimalitás (D-optimalitás): Az optimális mintavételnek ezt a megközelítést OU folyamat esetén Stehlík (2007) vizsgálta és megmutatta, hogy az ekvidisztáns minta döntő szerepet játszik az ismeretlen trend paraméter becslésében. Ezt követően Kisefák és Stehlík (2008), valamint Zagoraiou és Baldi Antognini (2009) konstans trenddel eltolt OU folyamat esetén igazolta, hogy a trend paraméter becslésére az ekvidisztáns minta optimális, valamint ez utóbbi szerzők azt is megmutatták, hogy az OU folyamat kovariancia paraméterére nem létezik optimális mintavétel. Baran és Stehlík (2014) általánosították Zagoraiou és Baldi Antognini (2009) eredményét oly módon, hogy az egydimenziós valós mintateret kiterjesztették monoton kétdimenziós halmazra, az OU folyamatot pedig ennek megfelelően OU mezőre.

Előrejelzés szerinti optimalitás (IMSPE kritérium): Ismeretes, hogy a krigelés technikájának alapvető célja a véletlen mező értékének megbecslése a mintatér egy nem megfigyelhető pontjában az összes eddigi megfigyelés alapján. Ekkor természetes kritériumként adódik a megfelelő függvény átlagos négyzetes hibájának (Mean Squared Prediction Error-MSPE) minimalizálása. Mivel a becslés pontossága általában függ a teljes mintatértől, Santner, Williams és Notz (2003) bevezette az úgynevezett Integrated Mean Squared Prediction Error (IMSPE) optimalitás fogalmát, ami azt jelenti, hogy a keresett optimális mintavételi elrendezést az átlagos négyzetes hiba mintatér felett tekintett integráljának minimumhelyeként adjuk meg. A dolgozat szempontjából fontos előzmény, hogy OU folyamat esetén Baldi Antognini és Zagoraiou (2010) megadta az IMSPE kritérium egzakt alakját és igazolták, hogy ebben az esetben az ekvidisztáns minta lesz az optimális.

A szerezhető információ mennyiség maximuma szerinti optimalitás (Entrópia kritérium): Az optimális mintavételnek az információelméleten alapuló megközelítése, amikor azokat a helyeket keressük, ahol a megszerezhető információ mennyisége a lehető legnagyobb. Mivel a Shannon entrópia a bizonytalanság mértékének egy igen jó jellemzője, Shewry és Wynn (1987) úgy gondolták, hogy a mintatér egy nem megfigyelt pontjának legjobb előrejelzésére vonatkozóan a megfigyelések entrópiája jó kritériumnak bizonyul. Eddig ebben az esetben is csak OU folyamatra születtek eredmények, méghozzá szintén Baldi Antognini és Zagoraiou (2010) révén, amikor is a szerzők megadták az entrópia kritérium egzakt alakját és igazolták, hogy ebben az esetben szintén az ekvidisztáns minta az optimális.

Az értekezés második felében OU mező esetén vizsgáljuk a mindhárom kritérium szerinti optimális mintavételt. Paraméterbecslés esetén Baran és Stehlík (2014) monoton halmazokra kimondott eredményeivel analóg állításokat fogalmazunk meg a D-optimalitásról a mintavételi helyek egy igen kézenfekvő elrendezésére, amikor is szabályos rácsot alkotnak. Előrejelzés esetén az IMSPE és az entrópia kritérium szerinti optimális mintavételt vizsgáljuk mindkét típusú mintarendszerre. A kapott eredményeket a dolgozat végén valós adatokra épülő numerikus szimulációk segítségével vizsgáljuk és hasonlítjuk össze.

1. fejezet

Gauss mezők eltolásparamétereinek becslése

A disszertáció első felében különböző Gauss-folyamatokkal meghajtott lineáris modellek paraméterbecsléseinek vizsgálatával foglalkozunk. A térbeli esetben, speciálisan amikor a folyamatot a sík pontjaiban értelmezzük, az egyik legjelentősebb Gauss mező a Wiener mező. Ez egy olyan térbeli centrált $\{W(s, t) : s, t \geq 0\}$ Gauss folyamat, melynek kovariancia struktúrája

$$EW(s_1, t_1)W(s_2, t_2) = \min(s_1, s_2) \cdot \min(t_1, t_2), \quad \forall s_1, s_2, t_1, t_2 \geq 0.$$

A másik igen gyakran használt véletlen mező az úgynevezett Ornstein-Uhlenbeck (OU) mező. A stacionárius OU mező alatt egy olyan centrált $\{\tilde{X}(s, t) : s, t \in \mathbb{R}\}$ Gauss-folyamatot értünk, melynek kovariancia struktúrája

$$E\tilde{X}(s_1, t_1)\tilde{X}(s_2, t_2) = \frac{\sigma^2}{4\alpha\beta} e^{-\alpha|s_2-s_1|-\beta|t_2-t_1|},$$

ahol $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\sigma > 0$. Legyen továbbá

$$X(s, t) = \sigma \int_0^s \int_0^t e^{\alpha(u-s)+\beta(v-t)} dW(u, v), \quad s, t \geq 0, \quad (1.2)$$

ahol $\alpha \in \mathbb{R}$, $\beta \in \mathbb{R}$, $\sigma > 0$, $\{W(s, t) : s, t \geq 0\}$ pedig egy standard Wiener mező. Ekkor az (1.2) alakú véletlen mezőt nulla kezdeti értékű OU mezőnek hívjuk, melynek értelmében a folyamat az értelmezési tartomány határain végig a nulla értéket veszi fel.

Tekintsük a következő Gauss mezővel meghajtott

$$Z(s, t) := m_1 g_1(s, t) + \cdots + m_p g_p(s, t) + U(s, t) \quad (1.3)$$

lineáris regressziót egy speciális $G \subset \mathbb{R}^2$ megfigyelési tartomány felett, ahol $g_1, \dots, g_p$ ismert függvények, U pedig egy Wiener vagy pedig egy OU mezőt jelöl. Célunk az $m_1, \dots, m_p$ ismeretlen paraméterek maximum likelihood (ML) becslésének meghatározása.

A modell és a becslés

Tekintsük az (1.3) modellt a $g_1, \dots, g_p : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}$ ismert függvényekkel és az $m_1, \dots, m_p \in \mathbb{R}$ ismeretlen regressziós paraméterekkel. Legyen $[a, c] \subset (0, \infty)$ és $b_1, b_2 \in (a, c)$, továbbá legyenek $\gamma_{1,2} : [a, b_1] \rightarrow \mathbb{R}$ és $\gamma_0 : [b_2, c] \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos, szigorúan monoton csökkenő függvények, illetve $\gamma_1 : [b_1, c] \rightarrow \mathbb{R}$ és $\gamma_2 : [a, b_2] \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos, szigorúan monoton növekvő függvények, melyekre $\gamma_{1,2}(b_1) = \gamma_1(b_1) > 0$, $\gamma_2(b_2) = \gamma_0(b_2)$, $\gamma_{1,2}(a) = \gamma_2(a)$ és $\gamma_1(c) = \gamma_0(c)$ teljesül. Tekintsük a $\Gamma := \Gamma_{1,2} \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_0$ görbét, ahol

$$\begin{aligned} \Gamma_{1,2} &:= \left\{ (s, \gamma_{1,2}(s)) : s \in [a, b_1] \right\}, & \Gamma_1 &:= \left\{ (s, \gamma_1(s)) : s \in [b_1, c] \right\}, \\ \Gamma_2 &:= \left\{ (s, \gamma_2(s)) : s \in [a, b_2] \right\}, & \Gamma_0 &:= \left\{ (s, \gamma_0(s)) : s \in [b_2, c] \right\}, \end{aligned}$$

és $\varepsilon > 0$ esetén jelölje $\Gamma_{1,2}^\varepsilon$, Γ_1^ε , Γ_2^ε és Γ_0^ε a $\Gamma_{1,2}$, Γ_1 , Γ_2 és Γ_0 egy ε -környezetét, azaz például

$$\begin{aligned} \Gamma_{1,2}^\varepsilon &:= \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [a, a + \varepsilon], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_{1,2}(a)] \text{ vagy} \right. \\ &\quad \left. s \in [a + \varepsilon, b_1], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_{1,2}(s) + \varepsilon] \right\}. \end{aligned}$$

Tegyük fel, hogy létezik egy olyan $\varepsilon > 0$, amely esetén fennáll

$$\Gamma_1^\varepsilon \cap \Gamma_2^\varepsilon = \emptyset \quad \text{és} \quad \Gamma_{1,2}^\varepsilon \cap \Gamma_0^\varepsilon = \emptyset,$$

továbbá legyen $G := G_1 \cup G_2 \cup G_3$, ahol

$$\begin{aligned} G_1 &:= \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [a, b_1 \wedge b_2], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_2(s)] \right\}, \\ G_2 &:= \begin{cases} \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [b_1, b_2], t \in [\gamma_1(s), \gamma_2(s)] \right\}, & \text{ha } b_1 \leq b_2, \\ \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [b_2, b_1], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_0(s)] \right\}, & \text{ha } b_1 > b_2, \end{cases} \\ G_3 &:= \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [b_1 \vee b_2, c], t \in [\gamma_1(s), \gamma_0(s)] \right\}. \end{aligned}$$

A disszertáció első felének fő eredménye Baran, Pap és Zuijlen (2011) által igazolt Theorem 2.1 általánosítása.

1.3. TÉTEL. *Ha $g_1, \dots, g_p$ kétszer folytonosan differenciálható a G tartomány belsejében és a $\partial_1 g_i$, $\partial_2 g_i$ és $\partial_1 \partial_2 g_i$, $i = 1, \dots, p$, parciális deriváltak folytonosan kiterjeszthetők G -re, akkor a Z , illetve W véletlen mezők által a $C(G)$ téren generált P_Z és P_W valószínűségi mértékek ekvivalensek és a P_Z mértéknek a P_W mértékre vonatkozó Radon-Nikodym deriváltja*

$$\frac{dP_Z}{dP_W}(Z) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{m}^\top A \mathbf{m} - 2\zeta^\top \mathbf{m}) \right\},$$

$$ahol \ A := (A_{k,\ell})_{k,\ell=1}^p, \ \mathbf{m} := (m_1, \dots, m_p)^\top \ \text{és} \ \zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_p)^\top,$$

$$\begin{aligned} A_{k,\ell} := & \frac{g_k(b_1, \gamma_{1,2}(b_1)) g_\ell(b_1, \gamma_{1,2}(b_1))}{b_1 \gamma_{1,2}(b_1)} \\ & + \int_a^{b_1} \frac{[g_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - s \partial_1 g_k(s, \gamma_{1,2}(s))] [g_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) - s \partial_1 g_\ell(s, \gamma_{1,2}(s))]}{s^2 \gamma_{1,2}(s)} ds \\ & + \int_{b_1}^c \frac{\partial_1 g_k(s, \gamma_1(s)) \partial_1 g_\ell(s, \gamma_1(s))}{\gamma_1(s)} ds + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \partial_2 g_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t)}{\gamma_2^{-1}(t)} dt \\ & + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \partial_2 g_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t)}{\gamma_{1,2}^{-1}(t)} dt + \iint_G \partial_1 \partial_2 g_k(s, t) \partial_1 \partial_2 g_\ell(s, t) ds dt, \end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned} \zeta_k := & \frac{g_k(b_1, \gamma_{1,2}(b_1)) Z(b_1, \gamma_{1,2}(b_1))}{b_1 \gamma_{1,2}(b_1)} + \int_{b_1}^c \frac{\partial_1 g_k(s, \gamma_1(s))}{\gamma_1(s)} Z(ds, \gamma_1(s)) \\ & + \int_a^{b_1} \frac{[g_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - s \partial_1 g_k(s, \gamma_{1,2}(s))]}{s^2 \gamma_{1,2}(s)} [Z(s, \gamma_{1,2}(s)) ds - s Z(ds, \gamma_{1,2}(s))] \\ & + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_2^{-1}(t), t)}{\gamma_2^{-1}(t)} Z(\gamma_2^{-1}(t), dt) + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t)}{\gamma_{1,2}^{-1}(t)} Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), dt) \\ & + \iint_G \partial_1 \partial_2 g_k(s, t) Z(ds, dt). \end{aligned}$$

Ha $\det(A) \neq 0$, akkor az $\mathbf{m}$ paramétervektornak a $\{Z(s, t) : (s, t) \in G\}$ megfigyelésén alapuló ML becslése $\hat{\mathbf{m}} = A^{-1}\zeta$ alakú és p -dimenziós normális eloszlású $\mathbf{m}$ várható érték vektorral és A^{-1} kovariancia mátrixszal.

1.4. MEGJEGYZÉS. Az 1.3. Tételben szereplő, a Wiener mező parciális deriváltjainak görbe menti súlyozott L^2 -Riemann integráljain a Baran, Pap és Zuijlen (2011) által bevezetett Definition 4.1-ben található definíciót értjük.

Az 1.3. Tétel eredményére támaszkodva a

$$\begin{aligned} \tilde{X}(s, t) &= \frac{\sigma}{2\sqrt{\alpha\beta}} e^{-\alpha s - \beta t} W(e^{2\alpha s}, e^{2\beta t}), \quad s, t \in \mathbb{R}, \\ X(s, t) &= \frac{\sigma}{2\sqrt{\alpha\beta}} e^{-\alpha s - \beta t} W(e^{2\alpha s} - 1, e^{2\beta t} - 1), \quad s, t \geq 0, \end{aligned}$$

reprezentációk segítségével az $(m_1, \dots, m_p)^\top$ paramétervektor becslését stacionárius, illetve nulla kezdeti értékű OU meghajtó mező esetén a következő két tétel adja meg.

1.10. TÉTEL. *Ha $h_1, \dots, h_p$ kétszer folytonosan differenciálható a G tartomány belsőjében és a $\partial_1 h_i, \partial_2 h_i$ és $\partial_1 \partial_2 h_i, i = 1, \dots, p$, parciális deriváltak folytonosan kiterjeszthetők G -re, akkor a Z , illetve $\tilde{X}$ véletlen mezők által a $C(G)$ téren generált P_Z és $P_{\tilde{X}}$ valószínűségi mértékek ekvivalensek és a P_Z mértéknek a $P_{\tilde{X}}$ mértékre vonatkozó Radon-Nikodym deriváltja*

$$\frac{dP_Z}{dP_{\tilde{X}}}(Z) = \exp \left\{ -\frac{\alpha\beta}{2\sigma^2} (\mathbf{m}^\top A \mathbf{m} - 2\zeta^\top \mathbf{m}) \right\},$$

ahol $A := (A_{k,\ell})_{k,\ell=1}^p$, $\mathbf{m} := (m_1, \dots, m_p)^\top$ és $\zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_p)^\top$,

$$\begin{aligned} A_{k,\ell} := & h_k(a, \gamma_2(a)) h_\ell(a, \gamma_2(a)) + h_k(c, \gamma_1(c)) h_\ell(c, \gamma_1(c)) \\ & + h_k(b_1, \gamma_1(b_1)) h_\ell(b_1, \gamma_1(b_1)) + h_k(b_2, \gamma_2(b_2)) h_\ell(b_2, \gamma_2(b_2)) \\ & + \int_a^{b_1} \left[\alpha h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] ds \\ & + \int_{b_1}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \left[h_\ell(s, \gamma_1(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_1(s)) \right] ds \\ & + \int_a^{b_2} \left[\alpha h_k(s, \gamma_2(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_2(s)) \right] \left[h_\ell(s, \gamma_2(s)) - \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_2(s)) \right] ds \\ & + \int_{b_2}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_0(s)) h_\ell(s, \gamma_0(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_0(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_0(s)) \right] ds \\ & + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \left[\beta h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \left[h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] dt \\ & + \int_{\gamma_1(b_1)}^{\gamma_1(c)} \left[\beta h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) \right] dt \\ & + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] dt \\ & + \int_{\gamma_0(b_2)}^{\gamma_0(c)} \left[\beta h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] \left[h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] dt \\ & + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta \partial_1 h_k(s, t) \partial_1 h_\ell(s, t) \right. \\ & \quad \left. + \alpha \beta^{-1} \partial_2 h_k(s, t) \partial_2 h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta^{-1} \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \partial_1 \partial_2 h_\ell(s, t) \right] ds dt \end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned}
\zeta_k &:= 4h_k(b_1, \gamma_1(b_1))Z(b_1, \gamma_1(b_1)) \\
&+ 2 \int_{b_1}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \left[Z(s, \gamma_1(s)) ds + \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_1(s)) \right] \\
&+ 2 \int_a^{b_1} \left[\alpha h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] \left[Z(s, \gamma_{1,2}(s)) ds - \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_{1,2}(s)) \right] \\
&+ 2 \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] \left[Z(\gamma_2^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_2^{-1}(t), dt) \right] \\
&+ 2 \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \left[\beta h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \left[Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), dt) \right] \\
&+ \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) + \beta \partial_1 h_k(s, t) + \alpha \partial_2 h_k(s, t) + \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \right] \\
&\quad \times \left[Z(s, t) ds dt + \alpha^{-1} Z(ds, t) dt + \beta^{-1} Z(s, dt) ds + \alpha^{-1} \beta^{-1} Z(ds, dt) \right].
\end{aligned}$$

Ha $\det(A) \neq 0$, akkor az $\mathbf{m}$ paramétervektornak a $\{Z(s, t) : (s, t) \in G\}$ megfigyelésén alapuló ML becslése $\hat{\mathbf{m}} = A^{-1}\zeta$ alakú és p -dimenziós normális eloszlású $\mathbf{m}$ várható érték vektorral és A^{-1} kovariancia mátrixszal.

1.11. TÉTEL. Ha $\alpha \neq 0$ és $\beta \neq 0$, $h_1, \dots, h_p$ kétszer folytonosan differenciálható a G tartomány belsejében és a $\partial_1 h_i$, $\partial_2 h_i$ és $\partial_1 \partial_2 h_i$, $i = 1, \dots, p$, parciális deriváltak folytonosan kiterjeszthetők G -re, akkor a Z , illetve X véletlen mezők által a $C(G)$ téren generált P_Z és P_X valószínűségi mértékek ekvivalensek és a P_Z mértéknek a P_X mértékre vonatkozó Radon-Nikodym deriváltja

$$\frac{dP_Z}{dP_X}(Z) = \exp \left\{ -\frac{\alpha\beta}{2\sigma^2} (\mathbf{m}^\top A \mathbf{m} - 2\zeta^\top \mathbf{m}) \right\},$$

ahol $A := (A_{k,\ell})_{k,\ell=1}^p$, $\mathbf{m} := (m_1, \dots, m_p)^\top$ és $\zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_p)^\top$,

$$\begin{aligned}
A_{k,\ell} &:= \coth(\alpha a) \coth(\beta \gamma_2(a)) h_k(a, \gamma_2(a)) h_\ell(a, \gamma_2(a)) \\
&+ h_k(c, \gamma_1(c)) h_\ell(c, \gamma_1(c)) + \coth(\beta \gamma_1(b_1)) h_k(b_1, \gamma_1(b_1)) h_\ell(b_1, \gamma_1(b_1)) \\
&+ \coth(\alpha b_2) h_k(b_2, \gamma_2(b_2)) h_\ell(b_2, \gamma_2(b_2)) \\
&+ \int_a^{b_1} \coth(\beta \gamma_{1,2}(s)) \left[\alpha h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) \right. \\
&\quad \left. + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] ds
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{b_1}^c \coth(\beta\gamma_1(s)) \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \\
& \quad \times \left[h_\ell(s, \gamma_1(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_1(s)) \right] ds \\
& + \int_a^{b_2} \left[\alpha \coth(\alpha s) h_k(s, \gamma_2(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_2(s)) \right] \\
& \quad \times \left[\coth(\alpha s) h_\ell(s, \gamma_2(s)) - \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_2(s)) \right] ds \\
& + \int_{b_2}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_0(s)) h_\ell(s, \gamma_0(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_0(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_0(s)) \right] ds \\
& + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \coth(\alpha\gamma_{1,2}^{-1}(t)) \left[\beta \coth(\beta t) h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \\
& \quad \times \left[\coth(\beta t) h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_1(b_1)}^{\gamma_1(c)} \left[\beta h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \coth(\alpha\gamma_2^{-1}(t)) \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) \right. \\
& \quad \left. + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_0(c)}^{\gamma_0(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] \left[h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta \partial_1 h_k(s, t) \partial_1 h_\ell(s, t) \right. \\
& \quad \left. + \alpha \beta^{-1} \partial_2 h_k(s, t) \partial_2 h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta^{-1} \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \partial_1 \partial_2 h_\ell(s, t) \right] ds dt
\end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned}
\zeta_k & := \left[1 + \coth(\alpha b_1) \right] \left[1 + \coth(\beta\gamma_1(b_1)) \right] h_k(b_1, \gamma_1(b_1)) Z(b_1, \gamma_1(b_1)) \\
& + \int_{b_1}^c \left[1 + \coth(\beta\gamma_1(s)) \right] \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \\
& \quad \times \left[Z(s, \gamma_1(s)) ds + \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_1(s)) \right] \\
& + \int_a^{b_1} \left[1 + \coth(\beta\gamma_{1,2}(s)) \right] \left[\alpha \coth(\alpha s) h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[\coth(\alpha s) Z(s, \gamma_{1,2}(s)) ds - \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_{1,2}(s)) \right] \\
& + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \left[1 + \coth(\alpha \gamma_2^{-1}(t)) \right] \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(\gamma_2^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_2^{-1}(t), dt) \right] \\
& + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \left[1 + \coth(\alpha \gamma_{1,2}^{-1}(t)) \right] \left[\beta h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), dt) \right] \\
& + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) + \beta \partial_1 h_k(s, t) + \alpha \partial_2 h_k(s, t) + \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(s, t) ds dt + \alpha^{-1} Z(ds, t) dt + \beta^{-1} Z(s, dt) ds + \alpha^{-1} \beta^{-1} Z(ds, dt) \right].
\end{aligned}$$

Ha $\det(A) \neq 0$, akkor az $\mathbf{m}$ paramétervektornak a $\{Z(s, t) : (s, t) \in G\}$ megfigyelésén alapuló ML becslése $\hat{\mathbf{m}} = A^{-1}\zeta$ alakú és p -dimenziós normális eloszlású $\mathbf{m}$ várható érték vektorral és A^{-1} kovariancia mátrixszal.

Arató, N. M (1997a), Baran, Pap és Zuiljen (2003, 2004, 2011) egyes állításait, valamint az 1.3., 1.10., 1.11. Tételeket Matlab segítségével megvalósított szimulációkkal is szemléltettük, melyekben a Gauss véletlen mezők szimulációját azok Karhunen-Loève közelítésével hajtottuk végre.

2. fejezet

Optimális mintavételi elhelyezések

A disszertáció második részében különböző kritériumok szerinti optimális mintavételi elhelyezések meghatározásával foglalkozunk Ornstein-Uhlenbeck (OU) mező esetén. Tekintsük a $\mathcal{X} = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$, $b_1 > a_1$, $b_2 > a_2$, téglalapon értelmezett

$$Y(s, t) = \theta + \varepsilon(s, t) \quad (2.1)$$

stacionárius folyamatot, ahol θ konstans, $\varepsilon(s, t)$, $s, t \in \mathbb{R}$, pedig egy

$$\mathbb{E} \varepsilon(s_1, t_1) \varepsilon(s_2, t_2) = \sigma^2 \exp(-\alpha|s_2 - s_1| - \beta|t_2 - t_1|),$$

kovariancia struktúrájú, centrált Gauss mező, ahol a σ -t (esetleg ismert) segédparaméterként kezeljük. Az optimális mintavételi terv meghatározását mind paraméterbecslések, mind pedig előrejelzések esetén a mintapontok két különböző halmazán hajtjuk végre. Az első esetben azt mondjuk, hogy az $\{(s_1, t_1), (s_2, t_2), \dots, (s_n, t_n)\} \subset \mathcal{X}$, $n \in \mathbb{N}$, megfigyelési halmaz teljesíti a monotonitási feltételt, ha $s_1 < s_2 < \dots < s_n$ és $t_1 < t_2 < \dots < t_n$, amíg az általunk vizsgált másik mintavételi elrendezés a szabályos rács, azaz amikor az $\{(s_1, t_1), (s_1, t_2), \dots, (s_n, t_m)\} \subset \mathcal{X}$, $n, m \in \mathbb{N}$, megfigyelési helyek egy téglalap rácspontjai ($n \times m$ darab).

D-optimálitás

A D-optimális mintavételi eljárás alatt azt értjük, amikor a mintapontoknak egy olyan elrendezését keressük, amely szerint a véletlen mező megfigyelései alapján a paraméterekre vonatkozó Fisher-féle információs mátrix determinánsa maximális.

A trend paraméter becslése

A folyamatot meghajtó ε OU mező kovariancia struktúrájának paraméterei mind adottak és csak a θ trend paraméter becslésére vonatkozó optimális elrendezést keressük.

Monoton halmazt alkotó mintapontok esetén Baran és Stehlík (2014) igazolta, hogy a θ trend paraméter becslésére szolgáló D-optimális mintavételt egy olyan alakú minta adja, ahol $\alpha d_i + \beta \delta_i$, $d_i := s_{i+1} - s_i$, $\delta_i := t_{i+1} - t_i$ $i = 1, 2, \dots, n-1$, mennyiség konstans.

Új eredményként megadtuk a Baran és Stehlík (2014) monoton esetben igazolt állításának a szabályos rácson megfigyelt folyamatra vonatkozó megfelelőjét.

2.5. TÉTEL. Tekintsük az $\{(s_i, t_j), i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m\}$ $n \times m$ -es szabályos rács mintapontjaiban megfigyelt (2.1) modellt és tegyük fel, hogy θ az egyetlen ismeretlen paraméter. Ekkor a Fisher-féle információ

$$M_\theta(n, m) = \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i}\right) \left(1 + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j}\right),$$

ahol $p_i := \exp(-\alpha d_i)$, $q_j := \exp(-\beta \delta_j)$, $d_i := s_{i+1} - s_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, és $\delta_j := t_{j+1} - t_j$, $j = 1, 2, \dots, m-1$. A θ paraméter becslésére vonatkozó D-optimalis mintavételt az iránymenti ekvidisztáns minta adja, azaz a $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1}$ és $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1}$ eset.

Kovariancia paraméterek becslése

A kovariancia paraméterek becslése esetén az OU mező α és β paramétereit kívánjuk becsülni, feltételezve, hogy a trend ismert. A trend paraméter becslésére vonatkozó esethez hasonlóan monoton halamazt alkotó mintapontok esetén Baran és Stehlík (2014) meghatározta a Fisher-féle információs mátrix egzakt alakját és igazolta, hogy az α , β kovariancia paraméterek becslésére vonatkozó D-optimalis mintavétel nem létezik.

Ennek analógiáját követve a 2.7. Tételben megadtuk szabályos rácson megfigyelt folyamat esetén is az

$$M_r(n) = \begin{bmatrix} M_\alpha(n) & M_{\alpha,\beta}(n) \\ M_{\alpha,\beta}(n) & M_\beta(n) \end{bmatrix}$$

Fisher-féle információs mátrix zárt alakját.

2.7. TÉTEL. Tekintsük az $\{(s_i, t_j), i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m\}$ $n \times m$ -es szabályos rács mintapontjaiban megfigyelt (2.1) OU folyamatot. Ekkor

$$M_\alpha(n, m) = m \sum_{i=1}^{n-1} \frac{d_i^2 p_i^2 (1 + p_i^2)}{(1 - p_i^2)^2}, \quad M_\beta(n, m) = n \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\delta_j^2 q_j^2 (1 + q_j^2)}{(1 - q_j^2)^2},$$

$$M_{\alpha,\beta}(n, m) = 2 \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{d_i p_i^2}{1 - p_i^2} \right) \left(\sum_{j=1}^{m-1} \frac{\delta_j q_j^2}{1 - q_j^2} \right),$$

ahol $d_i := s_{i+1} - s_i$, $\delta_j := t_{j+1} - t_j$ és $p_i := \exp(-\alpha d_i)$, $q_j := \exp(-\beta \delta_j)$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, $j = 1, 2, \dots, m-1$.

Szabályos rács esetén kétféle D-optimalitásról beszélhetünk. Általában a mintavételi rács pontjai az $\mathcal{X}$ tartományba tetszőlegesen helyezhetők el (szabad mintavétel), de megkövetelhetjük, hogy a megfigyelési halmaz tartalmazza az $\mathcal{X}$ csúcspontjait és velük együtt az éleken elhelyezkedő rácpontokat. Az utóbbi esetben korlátozott mintavételről beszélünk és a monoton esethez hasonlóan (Baran és Stehlík, 2014) bebizonyítottuk, hogy az α , β kovariancia paraméterek becslésére vonatkozó korlátozott D-optimalis mintavétel nem létezik.

Vizsgáltuk a szabad mintavételezésnek egy speciális esetét is, amikor a mintavétel rácpontjainak horizontális, valamint vertikális távolságai rendre azonosak és az optimalitást ezen két paraméter szerint értelmezzük. Ebben a speciális esetben igazoltuk a D-optimalis minta megadásához szükséges Fisher-féle információs mátrix determinánsának maximumáról szóló alábbi tételt.

2.14. TÉTEL. Ha $nm \geq 2(n-1)(m-1)$, akkor $\det(M_r(n, m))$ mindkét változójában szigorúan monoton csökkenő függvény, melynek maximuma a $d = \delta = 0$ esetben van. Ha $nm < 2(n-1)(m-1)$, akkor elég kicsi rögzített $d(\delta)$ esetén a $\det(M_r(n, m))$ függvénynek $d(\delta)$ szerint egyetlen maximumhelye van.

Az összes paraméter becslése

A legáltalánosabb esetben, amikor mind az α , β , mind pedig a θ paraméter ismeretlen, monoton megfigyelések esetén Baran és Stehlík (2014) igazolta, hogy az α , β kovariancia paraméterek és a θ trend paraméter becslése szerinti D-optimalis mintavétel nem létezik.

Szabályos rács esetén az optimalis mintavételi eljárás megadásához szükséges Fisher-féle információs mátrix determináns-függvényének nehezen kezelhetősége miatt két speciális esetben, nevezetesen az $\mathcal{X} = [0, 1]^2$ mintatéren egy kilencpontos korlátozott minta, valamint egy ekvidisztáns szabad minta esetén határoztuk meg a D-optimalis mintavételi elrendezést.

IMSPE kritérium

Ebben a fejezetben az Y véletlen mező előrejelzésére vonatkozó optimalis mintavételi elrendezést vizsgáljuk két kritérium és mindkét mintavételi elrendezés esetén. Tekintsük először az úgynevezett Integrated Mean Squared Prediction Error (IMSPE), amely az Y folyamat egy új $(x_1, x_2) \in \mathcal{X}$ megfigyelési pontbeli krigeléssel elkészített $\hat{Y}(x_1, x_2)$ becsült értékének az átlagos négyzetes hibáján alapszik. Ez a kritérium ennek az átlagos négyzetes hibának (Mean Squared Prediction Error, MSPE) különböző funkcionáljait minimalizálja. Mivel a becslés pontossága általában függ a teljes $\mathcal{X}$ mintatértől, az IMSPE függvény alakja

$$\text{IMSPE}(\hat{Y}) := \sigma^{-2} \iint_{\mathcal{X}} \text{MSPE}(\hat{Y}(x_1, x_2)) dx_1 dx_2.$$

Monoton megfigyelésekre az alábbi tételben megadtuk az IMSPE kritérium egzakt alakját az általánosságot nem csorbító $\mathcal{X} = [0, 1]^2$ esetben.

2.19. TÉTEL. Monoton halmazt alkotó mintavételi pontok esetén az Y folyamat $x \in \mathcal{X} = [0, 1]^2$ helyen felvett értéknek $\hat{Y}(x)$ becsléséhez tartozó MSPE függvény

$$\begin{aligned} \text{MSPE}(\hat{Y}(x)) = \sigma^2 & \left[1 - \varrho(x, s_n, t_n)^2 - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(\varrho(x, s_i, t_i) - \varrho(x, s_{i+1}, t_{i+1})\pi_i)^2}{1 - \pi_i^2} \right. \\ & \left. + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - \pi_i}{1 + \pi_i} \right)^{-1} \left(1 - \varrho(x, s_n, t_n) - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\varrho(x, s_i, t_i) - \varrho(x, s_{i+1}, t_{i+1})\pi_i}{1 + \pi_i} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

ahol $\pi_i := \exp(-\alpha d_i - \beta \delta_i)$, valamint $d_i := s_{i+1} - s_i$ és $\delta_i := t_{i+1} - t_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, a kapcsolódó IMSPE mutató értéke pedig

$$\text{IMSPE}(\hat{Y}) = 1 - A_n + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - \pi_i}{1 + \pi_i} \right)^{-1} B_n, \quad \text{ahol} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned}
A_n &= R_{1,1} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{R_{i,i}\pi_i^2 - 2R_{i+1,i}\pi_i + R_{i+1,i+1}}{1 - \pi_i^2}, \\
B_n &= 1 - 2\omega_n + R_{n,n} + \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{R_{i,i} - 2R_{i+1,i}\pi_i + R_{i+1,i+1}\pi_i^2}{(1 + \pi_i)^2} \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{(R_{n,i} - \omega_i) - (R_{n,i+1} - \omega_{i+1})\pi_i}{1 + \pi_i} \right) \\
&\quad + 2 \sum_{i=2}^{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{R_{i,j} - R_{i+1,j}\pi_i - R_{i,j+1}\pi_j + R_{i+1,j+1}\pi_i\pi_j}{(1 + \pi_i)(1 + \pi_j)}, \\
\omega_i &= -\frac{1}{\alpha\beta} \left[2 - e^{-\alpha(d_1 + \dots + d_{i-1})} e^{-\alpha(d_i + \dots + d_{n-1})} \right] \\
&\quad \times \left[2 - e^{-\beta(\delta_1 + \dots + \delta_{i-1})} - e^{-\beta(\delta_i + \dots + \delta_{n-1})} \right], \\
R_{i,j} &= \left[\frac{1}{2\alpha} \left(2e^{-\alpha(d_j + \dots + d_{i-1})} - e^{-\alpha(2d_1 + \dots + 2d_{j-1} + d_j + \dots + d_{i-1})} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - e^{-\alpha(d_j + \dots + d_{i-1} + 2d_i + \dots + 2d_{n-1})} \right) + (d_j + \dots + d_{i-1})e^{-\alpha(d_j + \dots + d_{i-1})} \right] \\
&\quad \times \left[\frac{1}{2\beta} \left(2e^{-\beta(\delta_j + \dots + \delta_{i-1})} - e^{-\beta(2\delta_1 + \dots + 2\delta_{j-1} + \delta_j + \dots + \delta_{i-1})} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - e^{-\beta(\delta_j + \dots + \delta_{i-1} + 2\delta_i + \dots + 2\delta_{n-1})} \right) + (\delta_j + \dots + \delta_{i-1})e^{-\beta(\delta_j + \dots + \delta_{i-1})} \right],
\end{aligned}$$

ahol $i, j \in \mathbb{N}$, $1 \leq j \leq i \leq n$.

Az IMSPE (2.27) által megadott alakjára az alábbi szimmetria tulajdonságot sikerült igazolni.

2.21. TÉTEL. A (2.27) által meghatározott IMSPE szimmetrikus abban az értelemben, hogy a (d_i, δ_i) és (d_{n-i}, δ_{n-i}) , $i = 1, 2, \dots, n-1$, távolság párok felcserélésével az $\text{IMSPE}(\hat{Y})$ értéke változatlan marad.

A 2.21. Tétel segítségével sikerült képet adni az IMSPE kritérium szerinti optimális minta egy fontos jellemzőjéről.

2.22. KÖVETKEZMÉNY. Az IMSPE kritérium szerinti optimális minta szimmetrikus, azaz ha az $\text{IMSPE}(\hat{Y})$ függvénynek az optimumhelye $(d_1^*, d_2^*, \dots, d_{n-1}^*, \delta_1^*, \delta_2^*, \dots, \delta_{n-1}^*)$, akkor $d_i^* = d_{n-i}^*$ és $\delta_i^* = \delta_{n-i}^*$, $i = 1, 2, \dots, n-1$.

Szabályos rácsot alkotó mintapontok esetén is sikerült meghatározni az MSPE, illetve az IMSPE függvények zárt alakját, amiket az alábbi tétel tartalmaz.

2.24. TÉTEL. Szabályos rácsot alkotó minta esetén

$$\begin{aligned}
\text{MSPE}(\hat{Y}(x_1, x_2)) &= \sigma^2 \left[1 - \left(\varrho_1^2(x_1, s_n) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(\varrho_1(x_1, s_i) - \varrho_1(x_1, s_{i+1})p_i)^2}{1 - p_i^2} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \left(\varrho_2^2(x_2, t_m) + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{(\varrho_2(x_2, t_j) - \varrho_2(x_2, t_{j+1})q_j)^2}{1 - q_j^2} \right) + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right)^{-1} \right]
\end{aligned}$$

$$\times \left(1 + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j} \right)^{-1} \left(1 - \left(\varrho_1(x_1, s_n) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\varrho_1(x_1, s_i) - \varrho_1(x_1, s_{i+1})p_i}{1 + p_i} \right) \right. \\ \left. \times \left(\varrho_2(x_2, t_m) + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\varrho_2(x_2, t_j) - \varrho_2(x_2, t_{j+1})q_j}{1 + q_j} \right) \right)^2 \Bigg],$$

ahol $p_i := \exp(-\alpha d_i)$, $q_j := \exp(-\beta \delta_j)$, $d_i := s_{i+1} - s_i$ és $\delta_j := t_{j+1} - t_j$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, $j = 1, 2, \dots, m-1$, valamint

$$\begin{aligned} \text{IMSPE}(\hat{Y}) = & 1 - \left(\frac{n-1}{\alpha} - 2 \sum_{i=1}^{n-1} \frac{d_i p_i^2}{1 - p_i^2} \right) \left(\frac{m-1}{\beta} - 2 \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\delta_j q_j^2}{1 - q_j^2} \right) \\ & + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right)^{-1} \left(1 + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j} \right)^{-1} \\ & \times \left[1 - \frac{8}{\alpha\beta} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right) \left(\sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j} \right) \right. \\ & \left. + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i^2 + 2\alpha d_i p_i}{\alpha(1 + p_i)^2} \right) \left(\sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j^2 + 2\beta \delta_j q_j}{\beta(1 + q_j)^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Az IMSPE kritérium szerinti optimális mintavételt az iránymenti ekvidisztáns minta adja, azaz amikor $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1}$ és $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1}$.

2.25. MEGJEGYZÉS. Itt szeretnénk megemlíteni, hogy a (2.35) által megadott IMSPE függvény éppen Baldi Antognini és Zagoraiou (2010, Proposition 4.1) OU folyamatra meghatározott eredményének kiterjesztése, az optimumra kapott állítás pedig Baldi Antognini és Zagoraiou (2010), Proposition 4.2 általánosítása.

Entrópia kritérium

Az IMSPE kritériumon kívül az általunk vizsgált másik előrejelzésen alapuló optimális mintavétel meghatározására szolgáló mennyiség az úgynevezett entrópia kritérium. Shewry és Wynn (1987) ötletét követve az optimális mintát a megfigyelések entrópiájának maximalizálásával határoztuk meg a mintapontok mindkét különböző halmaza esetén.

A 2.26. és 2.29. Tételben megadtuk mindkét pontrendszer esetén az eljárás alapjául szolgáló entrópia alakját, valamint meghatároztuk az optimális mintavételi elrendezést.

2.26. TÉTEL. *Monoton halmazt alkotó mintavételi pontok esetén a megfigyelések entrópiája*

$$\text{Ent}(\mathbf{Y}) = \frac{n}{2} (1 + \ln(2\pi\sigma^2)) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \ln(1 - \pi_i^2).$$

Az entrópia kritérium szerinti optimális mintavételt az az ekvidisztáns minta adja, ahol $\alpha d_i + \beta \delta_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, (azaz a π_i) konstans.

2.29. TÉTEL. Szabályos rácsot alkotó minta esetén az $\text{Ent}(\mathbf{Y})$ entrópia a következő alakban áll elő:

$$\text{Ent}(\mathbf{Y}) = \frac{nm}{2}(1 + \ln(2\pi\sigma^2)) + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \ln(1 - p_i^2) + \frac{n}{2} \sum_{j=1}^{m-1} \ln(1 - q_j^2).$$

Ekkor az entrópia kritérium szerinti optimális mintavételt a $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1}$ és $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1}$ iránymenti ekvidisztáns minta adja.

Az utolsó szakaszban szimuláció keretében hasonlítottuk össze az IMSPE és az entrópia kritériumot, valamint megvizsgáltuk a két mintavételi elrendezés viselkedését mindhárom kritérium esetén.

PhD Thesis

Spatial stochastic models and their applications

Kinga Sikolya

Supervisor: Dr. Sándor Baran



University of Debrecen
Doctoral School of Informatics Sciences
Debrecen, 2014.

Introduction

This Ph. D thesis contains new results on the parameter estimation and optimal design problems of spatial stochastic models. It consists of two parts, which can be treated separately. In this summary the enumeration of our theorems and definitions corresponds to the one used in the dissertation.

In the first part of dissertation we consider a spatial linear regression model driven by either a Wiener or a stationary or nonstationary Ornstein-Uhlenbeck (OU) sheet, and we find the explicit forms of the maximum-likelihood estimators (MLE) of the unknown parameters in the case of a quite general spatial domain. In some special cases of this model the parameter estimation have been widely studied in the literature. In the sixties Rozanov (1968) considered the simplest case, when a Wiener sheet shifted by a single trend parameter is observed on a rectangular domain and the estimator is expressed as a function of a usually unknown random variable satisfying some characterizing equation. Arató, N. M (1997a) generalized the results of Rozanov (1990) by investigating a more complicated domain of observations. Baran, Pap and Zuiljen (2003, 2004, 2011) derived an explicit form of the MLE of the shift parameter in three different cases when the domains got more and more complicated and instead of linear stochastic partial differential equations the authors applied an essentially simpler direct discrete approximation approach. We considered the same type of domain as in Baran, Pap and Zuiljen (2011) and extend their result for the general model with arbitrary number of unknown parameters. Our proof is also based on the discrete approximation method described in Baran, Pap and Zuiljen (2003, 2004, 2011).

Arató, N. M. (1997b) was the first who studied the case when the observed field is a shifted OU sheet, and using stochastic partial differential equations found the MLE of the unknown shift parameter based on the observation of the random field on a rectangular domain. With the help of discrete approximation and under slight analytic restrictions Baran, Pap and Zuiljen (2003) proved the result of Arató, N. M. (1997b) for stationary and nonstationary OU sheets. Here we extend these results by considering the more general domain (the one used by Baran, Pap and Zuiljen (2011)) and a trend which is a linear combination of known functions.

The first part ends with five simulation examples where we illustrate the theoretical results of Arató, N. M (1997a) and Baran, Pap and Zuiljen (2003, 2004, 2011) together with our main theorems. These results are published in Baran and Sikolya (2012a, b).

In the second part of the dissertation we deal with optimal design problems for parameter estimation and prediction of OU sheets shifted by a constant trend. The results presented here were reached jointly with Sándor Baran and Milan Stehlík and were published in Baran, Sikolya and Stehlík (2013, 2014). Optimality has several criteria. For parameter estimation one can consider D-optimality when an appropriate function of the

Fisher information is maximized, while for prediction, e.g., the so-called Integrated Mean Squared Prediction Error (IMSPE) or the entropy criterion can be applied.

Optimal parameter estimation (D-optimality): In case of OU processes this approach to optimal design was investigated by Stehlík (2007), who showed that equidistant design plays a crucial role for estimation of unknown trend of the process. Further, Kiseľák and Stehlík (2008) as well as Zagoraiou and Baldi Antognini (2009) proved that equidistant design is optimal for estimation of unknown trend parameter of an Ornstein-Uhlenbeck process. Further, the authors also showed that there is no optimal design for estimating the covariances of an OU process. Baran and Stehlík (2014) extended the result of Zagoraiou and Baldi Antognini (2009) in such a way that instead of the classical OU process on the positive real line they considered an OU sheet observed on a monotonic set.

Optimal prediction (IMSPE criterion): It is well-known that the main aim of the kriging technique consists in predicting the value of the random field at any untried location of the sample space based on the existing observations. In this case a natural criteria is to minimize suitable functionals of the Mean Squared Prediction Error (MSPE). Since the prediction accuracy is often related to the entire prediction region the design criterion IMSPE is the optimum of the integral of MSPE over the design space (Santner, Williams and Notz, 2003). One important antecedent is the result of Baldi Antognini and Zagoraiou (2010), where authors derived the exact form of IMSPE for an OU process and proved that the equidistant design is optimal.

Optimal information gain (Entropy criterion): Adopting an alternative approach based on the information theory, the optimal design problem consists in choosing the locations in order to acquire the maximum amount of information. Since the Shannon entropy represents a very popular measure of uncertainty, Shewry and Wynn (1987) had an idea that the observations of entropy can be regarded as a good criterion. In this case Baldi Antognini and Zagoraiou (2010) derived the exact form of entropy criterion for OU process and proved that the equidistant design is optimal.

In the second part of the dissertation we deal with optimal design problems with respect to three different optimality criteria. Two different settings of design points are considered, monotonic set and regular grid. We derive exact optimal designs for estimation of parameters of shifted OU sheets on regular grid. We investigate the optimal design for prediction of the random field with respect to IMSPE and entropy criteria for both arrangements of design points. At the end of this chapter we present some numerical experiments in order to compare the performance of IMSPE and entropy criteria and to give a comprehensive comparison of the statistical information of designs for OU sheets.

Chapter 1

Parameter estimation in linear regression driven by a Gaussian sheet

In the first part we deal with the problem of estimating the parameters of a linear regression model driven by a Gaussian sheet. The Wiener sheet is one of the most important examples of Gaussian random fields. We say $\{W(s, t) : s, t \geq 0\}$ is a standard Wiener sheet if it is a zero mean Gaussian random field with the following covariance function

$$\mathbb{E}W(s_1, t_1)W(s_2, t_2) = \min(s_1, s_2) \cdot \min(t_1, t_2) \quad \forall s_1, s_2, t_1, t_2 \geq 0.$$

Another important example of Gaussian random field is the Ornstein-Uhlenbeck (OU) sheet. The stationary OU sheet $\{\tilde{X}(s, t) : s, t \in \mathbb{R}\}$ is a zero mean Gaussian process with covariance structure

$$\mathbb{E}\tilde{X}(s_1, t_1)\tilde{X}(s_2, t_2) = \frac{\sigma^2}{4\alpha\beta}e^{-\alpha|s_2-s_1|-\beta|t_2-t_1|},$$

where $\alpha > 0$, $\beta > 0$, $\sigma > 0$, while the random field

$$X(s, t) = \sigma \int_0^s \int_0^t e^{\alpha(u-s)+\beta(v-t)} dW(u, v), \quad s, t \geq 0, \quad (1.2)$$

where $\alpha \in \mathbb{R}$, $\beta \in \mathbb{R}$, $\sigma > 0$ and $\{W(s, t) : s, t \geq 0\}$ is a standard Wiener sheet, can be considered as the OU sheet with zero initial condition on the axes.

We consider a linear regression model driven by a Gaussian sheet, that is a random field

$$Z(s, t) := m_1 g_1(s, t) + \cdots + m_p g_p(s, t) + U(s, t) \quad (1.3)$$

observed on a domain $G \subset \mathbb{R}^2$, where $g_1, \dots, g_p$ are known functions and U is either a Wiener or an OU sheet, and we determine the maximum likelihood estimator (MLE) of the unknown parameters $m_1, \dots, m_p$.

Models and estimators

Consider the model (1.3) with some given functions $g_1, \dots, g_p : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}$ and with unknown regression parameters $m_1, \dots, m_p \in \mathbb{R}$. Let $[a, c] \subset (0, \infty)$ and $b_1, b_2 \in (a, c)$,

let $\gamma_{1,2} : [a, b_1] \rightarrow \mathbb{R}$ and $\gamma_0 : [b_2, c] \rightarrow \mathbb{R}$ be continuous, strictly decreasing functions and let $\gamma_1 : [b_1, c] \rightarrow \mathbb{R}$ and $\gamma_2 : [a, b_2] \rightarrow \mathbb{R}$ be continuous, strictly increasing functions with $\gamma_{1,2}(b_1) = \gamma_1(b_1) > 0$, $\gamma_2(b_2) = \gamma_0(b_2)$, $\gamma_{1,2}(a) = \gamma_2(a)$ and $\gamma_1(c) = \gamma_0(c)$. Consider the curve $\Gamma := \Gamma_{1,2} \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_0$, where

$$\begin{aligned}\Gamma_{1,2} &:= \left\{ (s, \gamma_{1,2}(s)) : s \in [a, b_1] \right\}, & \Gamma_1 &:= \left\{ (s, \gamma_1(s)) : s \in [b_1, c] \right\}, \\ \Gamma_2 &:= \left\{ (s, \gamma_2(s)) : s \in [a, b_2] \right\}, & \Gamma_0 &:= \left\{ (s, \gamma_0(s)) : s \in [b_2, c] \right\},\end{aligned}$$

and for a given $\varepsilon > 0$ let $\Gamma_{1,2}^\varepsilon$, Γ_1^ε , Γ_2^ε and Γ_0^ε denote the inner ε -strip of $\Gamma_{1,2}$, Γ_1 , Γ_2 and Γ_0 , respectively, that is e.g.

$$\begin{aligned}\Gamma_{1,2}^\varepsilon &:= \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [a, a + \varepsilon], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_{1,2}(a)] \text{ or} \right. \\ &\quad \left. s \in [a + \varepsilon, b_1], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_{1,2}(s) + \varepsilon] \right\}.\end{aligned}$$

Suppose that there exists an $\varepsilon > 0$ such that

$$\Gamma_1^\varepsilon \cap \Gamma_2^\varepsilon = \emptyset \quad \text{and} \quad \Gamma_{1,2}^\varepsilon \cap \Gamma_0^\varepsilon = \emptyset,$$

and consider the set $G := G_1 \cup G_2 \cup G_3$, where

$$\begin{aligned}G_1 &:= \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [a, b_1 \wedge b_2], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_2(s)] \right\}, \\ G_2 &:= \begin{cases} \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [b_1, b_2], t \in [\gamma_1(s), \gamma_2(s)] \right\}, & \text{if } b_1 \leq b_2, \\ \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [b_2, b_1], t \in [\gamma_{1,2}(s), \gamma_0(s)] \right\}, & \text{if } b_1 > b_2, \end{cases} \\ G_3 &:= \left\{ (s, t) \in \mathbb{R}^2 : s \in [b_1 \vee b_2, c], t \in [\gamma_1(s), \gamma_0(s)] \right\}.\end{aligned}$$

The main result of the first part is the generalization Theorem 2.1 of Baran, Pap and Zuiljen (2011).

THEOREM 1.3. *If $g_1, \dots, g_p$ are twice continuously differentiable inside G and the partial derivatives $\partial_1 g_i$, $\partial_2 g_i$ and $\partial_1 \partial_2 g_i$, $i = 1, \dots, p$, can be continuously extended to G then the probability measures $\mathbf{P}_Z$ and $\mathbf{P}_W$, generated on $C(G)$ by the sheets Z and W , respectively, are equivalent and the Radon-Nikodym derivative of $\mathbf{P}_Z$ with respect to $\mathbf{P}_W$ equals*

$$\frac{d\mathbf{P}_Z}{d\mathbf{P}_W}(Z) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{m}^\top A \mathbf{m} - 2\zeta^\top \mathbf{m}) \right\},$$

where $A := (A_{k,\ell})_{k,\ell=1}^p$, $\mathbf{m} := (m_1, \dots, m_p)^\top$ and $\zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_p)^\top$ with

$$\begin{aligned}A_{k,\ell} &:= \frac{g_k(b_1, \gamma_{1,2}(b_1)) g_\ell(b_1, \gamma_{1,2}(b_1))}{b_1 \gamma_{1,2}(b_1)} \\ &+ \int_a^{b_1} \frac{[g_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - s \partial_1 g_k(s, \gamma_{1,2}(s))] [g_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) - s \partial_1 g_\ell(s, \gamma_{1,2}(s))]}{s^2 \gamma_{1,2}(s)} ds \\ &+ \int_{b_1}^c \frac{\partial_1 g_k(s, \gamma_1(s)) \partial_1 g_\ell(s, \gamma_1(s))}{\gamma_1(s)} ds + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \partial_2 g_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t)}{\gamma_2^{-1}(t)} dt \\ &+ \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \partial_2 g_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t)}{\gamma_{1,2}^{-1}(t)} dt + \iint_G \partial_1 \partial_2 g_k(s, t) \partial_1 \partial_2 g_\ell(s, t) ds dt,\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\zeta_k &:= \frac{g_k(b_1, \gamma_{1,2}(b_1)) Z(b_1, \gamma_{1,2}(b_1))}{b_1 \gamma_{1,2}(b_1)} + \int_{b_1}^c \frac{\partial_1 g_k(s, \gamma_1(s))}{\gamma_1(s)} Z(ds, \gamma_1(s)) \\
&+ \int_a^{b_1} \frac{[g_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - s \partial_1 g_k(s, \gamma_{1,2}(s))]}{s^2 \gamma_{1,2}(s)} [Z(s, \gamma_{1,2}(s)) ds - s Z(ds, \gamma_{1,2}(s))] \\
&+ \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_2^{-1}(t), t)}{\gamma_2^{-1}(t)} Z(\gamma_2^{-1}(t), dt) + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \frac{\partial_2 g_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t)}{\gamma_{1,2}^{-1}(t)} Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), dt) \\
&+ \iint_G \partial_1 \partial_2 g_k(s, t) Z(ds, dt).
\end{aligned}$$

If, $\det(A) \neq 0$, then the maximum likelihood estimator of the parameter vector $\mathbf{m}$ based on the observations $\{Z(s, t) : (s, t) \in G\}$ has the form $\hat{\mathbf{m}} = A^{-1}\zeta$ and has a p -dimensional normal distribution with mean $\mathbf{m}$ and covariance matrix A^{-1} .

REMARK 1.4. We remark that the weighted L^2 -Riemann integrals of partial derivatives of the Wiener sheet (and of other L^2 -processes) along a curve are defined in the sense of Baran, Pap and Zuiljen (2011, Definition 4.1).

Applying Theorem 1.3. and using representations

$$\begin{aligned}
\tilde{X}(s, t) &= \frac{\sigma}{2\sqrt{\alpha\beta}} e^{-\alpha s - \beta t} W(e^{2\alpha s}, e^{2\beta t}), \quad s, t \in \mathbb{R}, \\
X(s, t) &= \frac{\sigma}{2\sqrt{\alpha\beta}} e^{-\alpha s - \beta t} W(e^{2\alpha s} - 1, e^{2\beta t} - 1), \quad s, t \geq 0,
\end{aligned}$$

we obtain the explicit forms of the maximum-likelihood estimators of the parameters in the cases when the driving field is a stationary and a zero start OU sheet.

THEOREM 1.10. If $h_1, \dots, h_p$ are twice continuously differentiable inside G and the partial derivatives $\partial_1 h_i$, $\partial_2 h_i$ and $\partial_1 \partial_2 h_i$, $i = 1, \dots, p$, can be continuously extended to G then the probability measures $\mathbf{P}_Z$ and $\mathbf{P}_{\tilde{X}}$, generated on $C(G)$ by the sheets Z and $\tilde{X}$, respectively, are equivalent and the Radon-Nikodym derivative of $\mathbf{P}_Z$ with respect to $\mathbf{P}_{\tilde{X}}$ equals

$$\frac{d\mathbf{P}_Z}{d\mathbf{P}_{\tilde{X}}}(Z) = \exp \left\{ -\frac{\alpha\beta}{2\sigma^2} (\mathbf{m}^\top A \mathbf{m} - 2\zeta^\top \mathbf{m}) \right\},$$

where $A := (A_{k,\ell})_{k,\ell=1}^p$, $\mathbf{m} := (m_1, \dots, m_p)^\top$ and $\zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_p)^\top$, with

$$\begin{aligned}
A_{k,\ell} &:= h_k(a, \gamma_2(a)) h_\ell(a, \gamma_2(a)) + h_k(c, \gamma_1(c)) h_\ell(c, \gamma_1(c)) \\
&+ h_k(b_1, \gamma_1(b_1)) h_\ell(b_1, \gamma_1(b_1)) + h_k(b_2, \gamma_2(b_2)) h_\ell(b_2, \gamma_2(b_2))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_a^{b_1} \left[\alpha h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] ds \\
& + \int_{b_1}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \left[h_\ell(s, \gamma_1(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_1(s)) \right] ds \\
& + \int_a^{b_2} \left[\alpha h_k(s, \gamma_2(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_2(s)) \right] \left[h_\ell(s, \gamma_2(s)) - \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_2(s)) \right] ds \\
& + \int_{b_2}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_0(s)) h_\ell(s, \gamma_0(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_0(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_0(s)) \right] ds \\
& + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \left[\beta h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \left[h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_1(b_1)}^{\gamma_1(c)} \left[\beta h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_0(c)}^{\gamma_0(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] \left[h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta \partial_1 h_k(s, t) \partial_1 h_\ell(s, t) \right. \\
& \quad \left. + \alpha \beta^{-1} \partial_2 h_k(s, t) \partial_2 h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta^{-1} \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \partial_1 \partial_2 h_\ell(s, t) \right] ds dt
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\zeta_k &:= 4h_k(b_1, \gamma_1(b_1))Z(b_1, \gamma_1(b_1)) \\
& + 2 \int_{b_1}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \left[Z(s, \gamma_1(s)) ds + \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_1(s)) \right] \\
& + 2 \int_a^{b_1} \left[\alpha h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] \left[Z(s, \gamma_{1,2}(s)) ds - \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_{1,2}(s)) \right] \\
& + 2 \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] \left[Z(\gamma_2^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_2^{-1}(t), dt) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \int_{\gamma_{1,2}(a)}^{\gamma_{1,2}(b_1)} \left[\beta h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \left[Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), dt) \right] \\
& + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) + \beta \partial_1 h_k(s, t) + \alpha \partial_2 h_k(s, t) + \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(s, t) ds dt + \alpha^{-1} Z(ds, t) dt + \beta^{-1} Z(s, dt) ds + \alpha^{-1} \beta^{-1} Z(ds, dt) \right].
\end{aligned}$$

If, $\det(A) \neq 0$, then the maximum likelihood estimator of the parameter vector $\mathbf{m}$ based on the observations $\{Z(s, t) : (s, t) \in G\}$ has the form $\hat{\mathbf{m}} = A^{-1}\zeta$ and has a p -dimensional normal distribution with mean $\mathbf{m}$ and covariance matrix A^{-1} .

THEOREM 1.11. If $\alpha \neq 0$ and $\beta \neq 0$, functions $h_1, \dots, h_p$ are twice continuously differentiable inside G and the partial derivatives $\partial_1 h_i$, $\partial_2 h_i$ and $\partial_1 \partial_2 h_i$, $i = 1, \dots, p$, can be continuously extended to G then the probability measures P_Z and P_X , generated on $C(G)$ by the sheets Z and X , respectively, are equivalent and the Radon-Nikodym derivative of P_Z with respect to P_X equals

$$\frac{dP_Z}{dP_X}(Z) = \exp \left\{ -\frac{\alpha\beta}{2\sigma^2} (\mathbf{m}^\top A \mathbf{m} - 2\zeta^\top \mathbf{m}) \right\},$$

where $A := (A_{k,\ell})_{k,\ell=1}^p$, $\mathbf{m} := (m_1, \dots, m_p)^\top$ and $\zeta := (\zeta_1, \dots, \zeta_p)^\top$ with

$$\begin{aligned}
A_{k,\ell} &:= \coth(\alpha a) \coth(\beta \gamma_2(a)) h_k(a, \gamma_2(a)) h_\ell(a, \gamma_2(a)) \\
&+ h_k(c, \gamma_1(c)) h_\ell(c, \gamma_1(c)) + \coth(\beta \gamma_1(b_1)) h_k(b_1, \gamma_1(b_1)) h_\ell(b_1, \gamma_1(b_1)) \\
&+ \coth(\alpha b_2) h_k(b_2, \gamma_2(b_2)) h_\ell(b_2, \gamma_2(b_2)) \\
&+ \int_a^{b_1} \coth(\beta \gamma_{1,2}(s)) \left[\alpha h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) \right. \\
&\quad \left. + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] ds \\
&+ \int_{b_1}^c \coth(\beta \gamma_1(s)) \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \\
&\quad \times \left[h_\ell(s, \gamma_1(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_1(s)) \right] ds \\
&+ \int_a^{b_2} \left[\alpha \coth(\alpha s) h_k(s, \gamma_2(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_2(s)) \right] \\
&\quad \times \left[\coth(\alpha s) h_\ell(s, \gamma_2(s)) - \alpha^{-1} \partial_1 h_\ell(s, \gamma_2(s)) \right] ds
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{b_2}^c \left[\alpha h_k(s, \gamma_0(s)) h_\ell(s, \gamma_0(s)) + \alpha^{-1} \partial_1 h_k(s, \gamma_0(s)) \partial_1 h_\ell(s, \gamma_0(s)) \right] ds \\
& + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \coth(\alpha \gamma_{1,2}^{-1}(t)) \left[\beta \coth(\beta t) h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \\
& \quad \times \left[\coth(\beta t) h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) - \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_1(b_1)}^{\gamma_1(c)} \left[\beta h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_1^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_1^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \coth(\alpha \gamma_2^{-1}(t)) \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) \right. \\
& \quad \left. + \beta^{-1} \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \partial_2 h_\ell(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \int_{\gamma_0(c)}^{\gamma_0(b_2)} \left[\beta h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] \left[h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) + \beta^{-1} \partial_2 h_\ell(\gamma_0^{-1}(t), t) \right] dt \\
& + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta \partial_1 h_k(s, t) \partial_1 h_\ell(s, t) \right. \\
& \quad \left. + \alpha \beta^{-1} \partial_2 h_k(s, t) \partial_2 h_\ell(s, t) + \alpha^{-1} \beta^{-1} \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \partial_1 \partial_2 h_\ell(s, t) \right] ds dt
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\zeta_k & := \left[1 + \coth(\alpha b_1) \right] \left[1 + \coth(\beta \gamma_1(b_1)) \right] h_k(b_1, \gamma_1(b_1)) Z(b_1, \gamma_1(b_1)) \\
& + \int_{b_1}^c \left[1 + \coth(\beta \gamma_1(s)) \right] \left[\alpha h_k(s, \gamma_1(s)) + \partial_1 h_k(s, \gamma_1(s)) \right] \\
& \quad \times \left[Z(s, \gamma_1(s)) ds + \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_1(s)) \right] \\
& + \int_a^{b_1} \left[1 + \coth(\beta \gamma_{1,2}(s)) \right] \left[\alpha \coth(\alpha s) h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) - \partial_1 h_k(s, \gamma_{1,2}(s)) \right] \\
& \quad \times \left[\coth(\alpha s) Z(s, \gamma_{1,2}(s)) ds - \alpha^{-1} Z(ds, \gamma_{1,2}(s)) \right] \\
& + \int_{\gamma_2(a)}^{\gamma_2(b_2)} \left[1 + \coth(\alpha \gamma_2^{-1}(t)) \right] \left[\beta h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_2^{-1}(t), t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(\gamma_2^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_2^{-1}(t), dt) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\gamma_{1,2}(b_1)}^{\gamma_{1,2}(a)} \left[1 + \coth(\alpha \gamma_{1,2}^{-1}(t)) \right] \left[\beta h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) + \partial_2 h_k(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), t) dt + \beta^{-1} Z(\gamma_{1,2}^{-1}(t), dt) \right] \\
& + \iint_G \left[\alpha \beta h_k(s, t) + \beta \partial_1 h_k(s, t) + \alpha \partial_2 h_k(s, t) + \partial_1 \partial_2 h_k(s, t) \right] \\
& \quad \times \left[Z(s, t) ds dt + \alpha^{-1} Z(ds, t) dt + \beta^{-1} Z(s, dt) ds + \alpha^{-1} \beta^{-1} Z(ds, dt) \right].
\end{aligned}$$

If, $\det(A) \neq 0$, then the maximum likelihood estimator of the parameter vector $\mathbf{m}$ based on the observations $\{Z(s, t) : (s, t) \in G\}$ has the form $\hat{\mathbf{m}} = A^{-1}\zeta$ and has a p -dimensional normal distribution with mean $\mathbf{m}$ and covariance matrix A^{-1} .

To illustrate results of Arató, N. M (1997a), Baran, Pap and Zuiljen (2003, 2004, 2011) together with Theorem 1.3., 1.10., 1.11. we performed computer simulations using Matlab. In order to simulate the Gaussian random fields considered above their Karhunen-Loève expansions are applied.

Chapter 2

Optimal design problem

In Chapter 2 we study optimal design problem for parameter estimation and prediction of a shifted OU sheet. We consider the stationary process

$$Y(s, t) = \theta + \varepsilon(s, t) \quad (2.1)$$

defined on a rectangle $\mathcal{X} = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$ of $\mathbb{R}^2$ where θ is a constant trend and $\varepsilon(s, t)$, $s, t \in \mathbb{R}$, is a centered Gaussian random field with covariance structure

$$\mathbb{E} \varepsilon(s_1, t_1) \varepsilon(s_2, t_2) = \sigma^2 \exp(-\alpha|s_2 - s_1| - \beta|t_2 - t_1|),$$

where σ is treated as a (possibly) known nuisance parameter. Two different settings of design points are considered, monotonic set and regular grid. In the first case the design points $\{(s_1, t_1), (s_2, t_2), \dots, (s_n, t_n)\} \subset \mathcal{X}$, $n \in \mathbb{N}$, satisfy $s_1 < s_2 < \dots < s_n$ and $t_1 < t_2 < \dots < t_n$, while in the second the design $\{(s_i, t_j) : i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m\} \subset \mathcal{X}$, $n, m \in \mathbb{N}$, are grid points of a rectangular lattice.

D-optimality

We are looking for an arrangement of design points that maximizes the determinant of the Fisher information matrix on parameters based on the observations of the random field.

Estimation of trend parameter only

First we are interested merely in the estimation of the trend parameter θ assuming that all covariance parameters of the OU sheet ε are given.

In the case of a monotonic set Baran and Stehlík (2014) showed that the equidistant design where $\alpha d_i + \beta \delta_i$, $d_i := s_{i+1} - s_i$, $\delta_i := t_{i+1} - t_i$ $i = 1, 2, \dots, n-1$, is constant is optimal for estimation of θ .

As a new result the following theorem gives the exact form of the Fisher information on the trend parameter and optimal design in case of a regular grid design.

THEOREM 2.5. *Consider the OU model (2.1) observed in points $\{(s_i, t_j), i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m\}$ and assume that the only parameter of interest is the trend parameter*

θ . In this case the Fisher information is

$$M_\theta(n, m) = \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1-p_i}{1+p_i}\right) \left(1 + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{1-q_j}{1+q_j}\right),$$

where $p_i := \exp(-\alpha d_i)$, $q_j := \exp(-\beta \delta_j)$, $d_i := s_{i+1} - s_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, $\delta_j := t_{j+1} - t_j$, $j = 1, 2, \dots, m-1$, and the directionally equidistant design $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1}$ and $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1}$ is optimal for estimation of θ .

Estimation of covariance parameters only

We investigate D-optimality for estimation of the covariance parameters α and β of the OU sheet provided the trend is known.

Similar to the estimation to the trend, for monotonic sets Baran and Stehlík (2014) derived the exact form of the Fisher information matrix and they showed that the design which is optimal for estimation of the covariance parameters α , β does not exist.

In a similar way, in Theorem 2.7. we specify the exact form of the Fisher information matrix

$$M_r(n) = \begin{bmatrix} M_\alpha(n) & M_{\alpha,\beta}(n) \\ M_{\alpha,\beta}(n) & M_\beta(n) \end{bmatrix}$$

for regular grid designs.

THEOREM 2.7. *Consider the OU model (2.1) with covariance structure observed in points $\{(s_i, t_j), i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m\}$. Then*

$$M_\alpha(n, m) = m \sum_{i=1}^{n-1} \frac{d_i^2 p_i^2 (1 + p_i^2)}{(1 - p_i^2)^2}, \quad M_\beta(n, m) = n \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\delta_j^2 q_j^2 (1 + q_j^2)}{(1 - q_j^2)^2},$$

$$M_{\alpha,\beta}(n, m) = 2 \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{d_i p_i^2}{1 - p_i^2} \right) \left(\sum_{j=1}^{m-1} \frac{\delta_j q_j^2}{1 - q_j^2} \right),$$

where d_i, δ_j and p_i, q_j denote the same quantities as before, i.e. $d_i := s_{i+1} - s_i$, $\delta_j := t_{j+1} - t_j$ and $p_i := \exp(-\alpha d_i)$, $q_j := \exp(-\beta \delta_j)$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, $j = 1, 2, \dots, m-1$.

However, for regular grids two different notions of D-optimality are considered: restricted and boundary free. Usually the grid containing the design points can be arranged arbitrary in the design space $\mathcal{X}$ (boundary free design), but we may also require that it should contain the vertices of $\mathcal{X}$ (and the lattice points of the boundary as well). In the latter case we talk about restricted D-optimality and similar to the monotonic case (Baran and Stehlík, 2014) we prove that the restricted D-optimal design for estimation of the covariance parameters does not exist. We also investigate boundary free directionally equidistant designs, that is designs where $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1} =: d$ and $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1} =: \delta$, $d_i := s_{i+1} - s_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, $\delta_j := t_{j+1} - t_j$, $j = 1, 2, \dots, m-1$ and we prove Theorem 2.14., which gives us some idea about the behaviour of the determinant of Fisher information matrix.

THEOREM 2.14. *If $nm \geq 2(n-1)(m-1)$ then $\det(M_r(n, m))$ is strictly monotone decreasing both in d and δ , so its maximum is reached at $d = \delta = 0$. If $nm < 2(n-1)(m-1)$ then for fixed and small enough d (δ), function $\det(M_r(n, m))$ has a single maximum in δ (d).*

Estimation of all parameters

In the most general case, when both the covariance parameters α , β and the trend parameter θ are unknown, Baran and Stehlík (2014) proved that the monotonic design which is optimal for estimation of all three parameters does not exist. In case of a regular grid the main problem is the extremely complex form of the Fisher information matrix. Hence, we study only two special cases. We derive the D-optimal arrangement of observation points for a restricted nine-point design and for the boundary free equidistant design.

IMSPE criterion

We investigate the optimal design for prediction of the random field Y with respect to two different optimality criteria for both arrangements of design points. First we study the so-called Integrated Mean Squared Prediction Error (IMSPE) criterion. It is well-known that the main aim of the kriging technique consists in predicting the output of the investigated random field on the experimental region, and for any untried location $(x_1, x_2) \in \mathcal{X}$ the estimation procedure is focused on the best linear unbiased estimator of $\hat{Y}(x_1, x_2)$ of $Y(x_1, x_2)$. Thus natural criteria will minimize suitable functionals of the Mean Squared Prediction Error (MSPE). Since the prediction accuracy is often related to the entire prediction region $\mathcal{X}$ the IMSPE function is given by

$$\text{IMSPE}(\hat{Y}) := \sigma^{-2} \iint_{\mathcal{X}} \text{MSPE}(\hat{Y}(x_1, x_2)) dx_1 dx_2.$$

In Theorem 2.19. we derive the exact form of the IMSPE function for a shifted OU sheet observed in points satisfying the monotonicity condition in the case $\mathcal{X} = [0, 1]^2$ which does not restrict the generality.

THEOREM 2.19. *For monotonic sets the MSPE of the estimator $\hat{Y}(x)$ of the random field Y at a point $x \in \mathcal{X} = [0, 1]^2$ has the form*

$$\begin{aligned} \text{MSPE}(\hat{Y}(x)) = \sigma^2 & \left[1 - \varrho(x, s_n, t_n)^2 - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(\varrho(x, s_i, t_i) - \varrho(x, s_{i+1}, t_{i+1})\pi_i)^2}{1 - \pi_i^2} \right. \\ & \left. + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - \pi_i}{1 + \pi_i} \right)^{-1} \left(1 - \varrho(x, s_n, t_n) - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\varrho(x, s_i, t_i) - \varrho(x, s_{i+1}, t_{i+1})\pi_i}{1 + \pi_i} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

where $q_i := \exp(-\alpha d_i - \beta \delta_i)$ with $d_i := s_{i+1} - s_i$, $\delta_i := t_{i+1} - t_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$. Further,

$$\text{IMSPE}(\hat{Y}) = 1 - A_n + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - \pi_i}{1 + \pi_i} \right)^{-1} B_n, \quad (2.27)$$

where

$$A_n = R_{1,1} + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{R_{i,i}\pi_i^2 - 2R_{i+1,i}\pi_i + R_{i+1,i+1}}{1 - \pi_i^2},$$

$$\begin{aligned}
B_n &= 1 - 2\omega_n + R_{n,n} + \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{R_{i,i} - 2R_{i+1,i}\pi_i + R_{i+1,i+1}\pi_i^2}{(1 + \pi_i)^2} \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{(R_{n,i} - \omega_i) - (R_{n,i+1} - \omega_{i+1})\pi_i}{1 + \pi_i} \right) \\
&\quad + 2 \sum_{i=2}^{n-1} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{R_{i,j} - R_{i+1,j}\pi_i - R_{i,j+1}\pi_j + R_{i+1,j+1}\pi_i\pi_j}{(1 + \pi_i)(1 + \pi_j)}, \\
\omega_i &= -\frac{1}{\alpha\beta} \left[2 - e^{-\alpha(d_1 + \dots + d_{i-1})} e^{-\alpha(d_i + \dots + d_{n-1})} \right] \\
&\quad \times \left[2 - e^{-\beta(\delta_1 + \dots + \delta_{i-1})} - e^{-\beta(\delta_i + \dots + \delta_{n-1})} \right], \\
R_{i,j} &= \left[\frac{1}{2\alpha} \left(2e^{-\alpha(d_j + \dots + d_{i-1})} - e^{-\alpha(2d_1 + \dots + 2d_{j-1} + d_j + \dots + d_{i-1})} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - e^{-\alpha(d_j + \dots + d_{i-1} + 2d_i + \dots + 2d_{n-1})} \right) + (d_j + \dots + d_{i-1})e^{-\alpha(d_j + \dots + d_{i-1})} \right] \\
&\quad \times \left[\frac{1}{2\beta} \left(2e^{-\beta(\delta_j + \dots + \delta_{i-1})} - e^{-\beta(2\delta_1 + \dots + 2\delta_{j-1} + \delta_j + \dots + \delta_{i-1})} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - e^{-\beta(\delta_j + \dots + \delta_{i-1} + 2\delta_i + \dots + 2\delta_{n-1})} \right) + (\delta_j + \dots + \delta_{i-1})e^{-\beta(\delta_j + \dots + \delta_{i-1})} \right],
\end{aligned}$$

$i, j \in \mathbb{N}, 1 \leq j \leq i \leq n$

We managed to prove the following theorem for the form of IMSPE.

THEOREM 2.21. *IMSPE given by (2.27) is symmetric in the sense that the interchange of pairs of distances (d_i, δ_i) and (d_{n-i}, δ_{n-i}) , $i = 1, 2, \dots, n-1$, does not change the value of $\text{IMSPE}(\hat{Y})$.*

Theorem 2.21. gives us some idea about the behaviour of the optimal design with respect to IMSPE criterion.

COROLLARY 2.22. *The optimal design with respect to IMSPE criterion is symmetric, that is if the optimum of $\text{IMSPE}(\hat{Y})$ is reached at $(d_1^*, d_2^*, \dots, d_{n-1}^*, \delta_1^*, \delta_2^*, \dots, \delta_{n-1}^*)$ then $d_i^* = d_{n-i}^*$ and $\delta_i^* = \delta_{n-i}^*$, $i = 1, 2, \dots, n-1$.*

For regular grid designs we also determine the closed forms of MSPE and IMSPE functions.

THEOREM 2.24. *For regular grid designs*

$$\begin{aligned}
\text{MSPE}(\hat{Y}(x_1, x_2)) &= \sigma^2 \left[1 - \left(\varrho_1^2(x_1, s_n) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(\varrho_1(x_1, s_i) - \varrho_1(x_1, s_{i+1})p_i)^2}{1 - p_i^2} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \left(\varrho_2^2(x_2, t_m) + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{(\varrho_2(x_2, t_j) - \varrho_2(x_2, t_{j+1})q_j)^2}{1 - q_j^2} \right) + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right)^{-1} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left(1 + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j} \right)^{-1} \left(1 - \left(\varrho_1(x_1, s_n) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\varrho_1(x_1, s_i) - \varrho_1(x_1, s_{i+1})p_i}{1 + p_i} \right) \right. \\ & \left. \times \left(\varrho_2(x_2, t_m) + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\varrho_2(x_2, t_j) - \varrho_2(x_2, t_{j+1})q_j}{1 + q_j} \right) \right)^2 \Bigg], \end{aligned}$$

where again $p_i := \exp(-\alpha d_i)$, $q_j := \exp(-\beta \delta_j)$ with $d_i := s_{i+1} - s_i$ and $\delta_j := t_{j+1} - t_j$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, $j = 1, 2, \dots, m-1$. Further,

$$\begin{aligned} \text{IMSPE}(\hat{Y}) = & 1 - \left(\frac{n-1}{\alpha} - 2 \sum_{i=1}^{n-1} \frac{d_i p_i^2}{1 - p_i^2} \right) \left(\frac{m-1}{\beta} - 2 \sum_{j=1}^{m-1} \frac{\delta_j q_j^2}{1 - q_j^2} \right) \\ & + \left(1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right)^{-1} \left(1 + \sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j} \right)^{-1} \\ & \times \left[1 - \frac{8}{\alpha\beta} \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i}{1 + p_i} \right) \left(\sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j}{1 + q_j} \right) \right. \\ & \left. + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - p_i^2 + 2\alpha d_i p_i}{\alpha(1 + p_i)^2} \right) \left(\sum_{j=1}^{m-1} \frac{1 - q_j^2 + 2\beta \delta_j q_j}{\beta(1 + q_j)^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

For any sample size the directionally equidistant design $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1}$ and $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1}$ is optimal with respect to the IMSPE criterion.

REMARK 2.25. We remark that (2.35) is an extension of the IMSPE criterion for the classical OU process given by Baldi Antognini and Zagoraiou (2010, Proposition 4.1), while the optimality result generalizes Proposition 4.2 of Baldi Antognini and Zagoraiou (2010).

Entropy criterion

Another possible approach to optimal design is to find locations which maximize the amount of obtained information. Following the ideas of Shewry and Wynn (1987) one has to maximize the entropy of the observations corresponding to the chosen design. In Theorems 2.26. and 2.29. we derive the exact forms of the entropy function and the optimal designs for both arrangements of observation points.

THEOREM 2.26. *For monotonic sets entropy $\text{Ent}(\mathbf{Y})$ has the form*

$$\text{Ent}(\mathbf{Y}) = \frac{n}{2} (1 + \ln(2\pi\sigma^2)) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \ln(1 - q_i^2).$$

For any sample size the equidistant design when values $\alpha d_i + \beta \delta_i$, $i = 1, 2, \dots, n-1$ (and in this way q_i), are constant is optimal with respect to the entropy criterion.

THEOREM 2.29. *For regular grid designs entropy $\text{Ent}(\mathbf{Y})$ has the form*

$$\text{Ent}(\mathbf{Y}) = \frac{nm}{2} (1 + \ln(2\pi\sigma^2)) + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \ln(1 - p_i^2) + \frac{n}{2} \sum_{j=1}^{m-1} \ln(1 - q_j^2).$$

For any sample size the directionally equidistant design $d_1 = d_2 = \dots = d_{n-1}$ and $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_{m-1}$ is optimal with respect to the entropy criterion.

In the last part of Chapter 2 we present some numerical experiments in order to compare the performance of IMSPE and entropy criteria and investigate behaviour of both sampling arrangements for all three criteria.

Irodalomjegyzék/References

- Arató, N. M., 1997a. Mean estimation of Brownian sheet. *Comput. Math. Appl.* **33**, no. 8, 13–25.
- Arató, N. M., 1997b. Mean estimation of Brownian and Ornstein–Uhlenbeck sheets. *Teor. Veroyatnost i Primen* **42**, 375–376.
- Baldi Antognini, A., Zagoraiou, M., 2010. Exact optimal designs for computer experiments via Kriging metamodeling, *J. Statist. Plann. Inference* **140**, 2607–2617.
- Baran, S., Pap, G. and Zuijlen, M. v., 2003. Estimation of the mean of stationary and nonstationary Ornstein-Uhlenbeck processes and sheets. *Comput. Math. Appl.* **45**, no. 4-5, 563–579.
- Baran, S., Pap, G. and Zuijlen, M. v., 2004. Estimation of the mean of a Wiener sheet. *Stat. Inference Stoch. Process.* **7**, no. 3, 279–304.
- Baran, S., Pap, G., Zuijlen M. v., 2011. Parameter estimation of a shifted Wiener sheet. *Statistics* **45**, no. 4, 319–335.
- Baran, S., Sikolya, K., 2012a. Parameter estimation in linear regression driven by a Gaussian sheet. *Acta Sci. Math. (Szeged)* **78** no. 3-4, 689–713.
- Baran, S., Sikolya, K., 2012b. Parameter estimation in linear regression driven by a Wiener sheet. *Ann. Math. Inform.* **39**, 3–15.
- Baran, S., Sikolya, K., Stehlík, M., 2013. On the optimal designs for prediction of Ornstein-Uhlenbeck sheets. *Statist. Probab. Lett.* **83**, 1580–1587.
- Baran, S., Sikolya, K., Stehlík, M., 2014. Optimal designs for the methane flux in troposphere. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, benyújtva.
- Baran, S., Stehlík, M., 2014. Optimal designs for parameters of shifted Ornstein-Uhlenbeck sheets measured on monotonic sets, *Statist. Probab. Lett.*, benyújtva (arXiv:1312.0099).
- Kiseflák, J., Stehlík, M., 2008. Equidistant D-optimal designs for parameters of Ornstein-Uhlenbeck process. *Statist. Probab. Lett.* **78**, 1388–1396.
- Rozanov, Yu. A., 1968. *Gaussian Infinite-dimensional Distributions*. (in Russian). Tr. Mat. Inst. Akad. Nauk SSSR, Nauka, Moscow.
- Rozanov, Yu. A., 1990. Some boundary problems for generalized random fields. *Theor. Probab. Appl.* **35**, no. 4, 707–724.

- Santner, T. J., Williams, B. J., Notz, W. I., 2003. *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer-Verlag, New York.
- Shewry, M.C., Wynn, H.P., 1987. Maximum entropy sampling. *J. Appl. Stat.* **14**, 165–170.
- Stehlík, M., 2007. D-optimal designs and equidistant designs for stationary processes. In : López-Fidalgo, J., Rodríguez-Díaz, J. M. and Torsney, B. (eds). Proc. mODa8, 205–211.
- Zagoraiou, M., Baldi Antognini, A., 2009. Optimal designs for parameter estimation of the Ornstein-Uhlenbeck process. *Appl. Stoch. Models Bus. Ind.* **25**, 583–600.

A szerző publikációi/Publications

Referált folyóiratban megjelent, illetve elfogadott cikkek:

1. Baran, S., Sikolya, K., Veress, L., Estimating the risk of a Down's syndrome term pregnancy using age and serum markers: Comparison of various methods. *Comm. Statist. Simulation Comput.* **42** (2013), no. 7, 1654–1672. (IF: 0.288; Math.Rev.: MR3042791; Zbl pre06175740; Scopus)
2. Baran, S., Sikolya, K., Parameter estimation in linear regression driven by a Gaussian sheet. *Acta Sci. Math. (Szeged)* **78** (2012), no. 3-4, 689–713. (Math.Rev.: MR3057694; Scopus)
3. Baran, S., Sikolya, K., Parameter estimation in linear regression driven by a Wiener sheet. *Ann. Math. Inform.* **39** (2012), 3–15. (Math.Rev.: MR2959877; Zbl 1265.60097; Scopus)
4. Baran, S., Sikolya, K., Stehlík, M., On the optimal designs for prediction of Ornstein-Uhlenbeck sheets. *Statist. Probab. Lett.* **83** (2013), no. 6, 1580–1587. (IF: 0.531; Math.Rev.: MR3048326; Zbl pre06236673; Scopus)
5. Baran, S., Pap, G., Sikolya, K., Testing stability in a spatial unilateral autoregressive model. *Comm. Statist. Theory and Methods* (2014), elfogadva, doi:10.1080/03610926.2013.853792. (IF: 0.284)

Közlésre benyújtott cikkek:

1. Baran, S., Sikolya, K., Stehlík, M., Optimal designs for the methane flux in troposphere. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, benyújtva (arXiv:1404.1839).

A szerző konferencia-előadásai/List of conference talks

1. *A Down szindróma kockázatának elemzése az anya életkora és különböző biokémiai markerek szintje alapján*, XXIX. Országos Tudományos Diákköri Konferencia, I. helyezés, Debrecen, Magyarország, 2008. április 8–10.
2. *Estimating the risk of Down's syndrome term pregnancy using age and serum markers*, 14th Young Statisticians Meeting, Basovizza (Trieste), Olaszország, 2009. október 16–18.
3. *Estimating the risk of a Down's syndrome term pregnancy: comparison of various methods*, 8th International Conference on Applied Informatics, Eger, Magyarország, 2010. január 27–30. (poszter)
4. *Parameter estimation in linear regression driven by a Wiener sheet*, Conference on Stochastic Models and their Applications, Debrecen, Magyarország, 2011. augusztus 22–24. (poszter)

5. *Estimating the risk of a Down's syndrome term pregnancy using age and serum markers*, 2nd Conference of the Central European Network, Zürich, Svájc, 2011. szeptember 12–16,
6. *Estimating the risk of a Down's syndrome term pregnancy using age and serum markers*, ITSM 2011, Debrecen, Magyarország, 2011. október 27.
7. *Parameter estimation in linear regression driven by a Gaussian sheet*, 10th German Probability and Statistics Days, Mainz, Németország, 2012. március 5–9.
8. *Parameter estimation in a spatial linear regression model*, The Third Conference of PhD Students in Mathematics, Szeged, Magyarország, 2012. június 28–30.
9. *Testing stability in a spatial unilateral autoregressive model*, 8th World Congress in Probability and Statistics, Isztambul, Törökország, 2012. július 9–14.
10. *On the optimal designs for prediction of Ornstein-Uhlenbeck sheets*, 15th Applied Stochastic Models and Data Analysis, Mataró (Barcelona), Spanyolország, 2013. június 25–28.
11. *Optimal designs for prediction of shifted Ornstein-Uhlenbeck sheets*, 29th European Meeting of Statisticians, Budapest, Magyarország, 2013. július 20–25.
12. *Stability testing for a special Pickard model*, 18th European Young Statisticians Meetings, Osijek, Horvátország, 2013. augusztus 26–30.
13. *Optimal designs for the methane flux in troposphere*, 11th German Probability and Statistics Days, Ulm, Németország, 2014. március 4–7.
14. *Optimal designs for parameters of shifted Ornstein-Uhlenbeck sheets and of modified Arrhenius model observed on a regular grid*, 3rd Stochastic Modeling Techniques and Data Analysis, Lisszabon, Portugália, 2014. június 11–14.